晶体学基础

选择 ：有关德布罗意波的计算

德布罗意公式

$$E = h\nu = \hbar\omega$$
$$\vec{P} = \frac{h}{\lambda}\vec{n} = \hbar\vec{k}$$

一维无限深势阱的能量

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{8\mu a^2}, n = 1,2,3\cdots$$

$\hat{L}^2$ 的本征值是 $(2l+1)$ 度简并的

任意相邻两能级之差(能级间隔）：

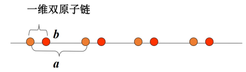
$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\hbar^2\pi^2(n+1)^2}{8\mu a^2} - \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{8\mu a^2}$$
$$= \frac{\hbar^2\pi^2}{8\mu a^2}(2n+1) \qquad (10)$$

算符和力学量间的关系

$\hat{H}\psi = E\psi$ → 推广到一般算符

基本假定：如果算符 $\hat{F}$ 表示力学量F，那么当体系处于算符 $\hat{F}$ 的本征态 φ 时，力学量F有确定值，这个值就是算符 $\hat{F}$ 在 φ 态中的本征值。 $\hat{F}\varphi = F\varphi$

一维双原子链



波恩提出的关于波函数的统计解释

证明题

性质：如果 $\hat{F}$ 是厄密算符，则它的本征值一定是实数。

2. 1. 1 算符的引入

证明： $\hat{F}$ — 厄密算符　 λ — $\hat{F}$的本征值　 ψ — 本征函数

$\therefore \hat{F}\psi = \lambda\psi$　 $\because \int \psi^* \hat{F}\varphi dx = \int (\hat{F}\psi)^* \varphi dx$ （定义式）

令 $\varphi = \psi$

$$\therefore \int \psi^* \hat{F}\psi dx = \int (\hat{F}\psi)^* \psi dx \qquad (3)$$

$\lambda\psi$　　$\lambda\psi$

$$\lambda \int \psi^* \psi dx = \lambda^* \int \psi^* \psi dx \qquad (4)$$

$\therefore \lambda = \lambda^*$ → 本征值 λ 为实数

例2：证明体心立方的倒格是面心立方。

计算题

设在 H_0表象中， $H = H_0 + H'$ 的矩阵形式为

$$H = \begin{pmatrix} E_1^{(0)} + a & b \\ b & E_2^{(0)} + a \end{pmatrix}$$

（a、b为实数），用微扰理论求能量到二级修正。

计算简单立方和面心立方的致密度